

マテリアルキュレーション：材料情報の活用による材料探索例 2

Materials Curation: case study #2

物材機構¹ ○吉武 道子¹

NIMS¹, °Michiko Yoshitake¹

E-mail: yoshitake.michiko@nims.go.jp

「マテリアルキュレーション」は、ごく最近使われ始めた「キュレーション」という言葉をマテリアルに対して適用しようと、発表者が作り出した造語である[1]。「キュレーション」という言葉は、美術館や博物館で展示物の収集や展覧会の企画を担当する専門職を指す「キュレーター」という言葉に由来する。キュレーターの行っている“①既存のコンテンツの意味を捉えなおし、②選択・絞込み・結合・編集を行い、③新しい価値・意味づけ・文脈をユーザーに提供する”ことを「キュレーション」と呼ぶ。これは、爆発的に増加する情報に埋もれる知識を有効活用する手法としてビジネス界で注目されつつある。

昨年春の応用物理学会でその概要を [2]、その具体例 1 を本年春の応用物理学会で紹介した[3]。今回は、具体例 2 として熱電変換材料を取り上げる。熱起電力発生の物理的メカニズムから、熱電変換材料候補として考えられていない材料系も含めて広く、第一原理計算結果を報告している文献を用いて、また熱伝導率を抑える構造をもつ物質に関する文献を用いて、マテリアルキュレーションにより材料探索した例を紹介する。

図に示したのは、n 型半導体において、不純物準位と伝導帯の下端とのエネルギー差に比べ温度が十分に低いときの電子のエネルギー分布および化学ポテンシャル μ の位置（上）と、高温で価電子帯の電子が一部伝導帯に励起された状態の電子のエネルギー分布および化学ポテンシャル μ の位置（下）を示したものである。この化学ポテンシャルの位置の違いが、低温部と高温部との間に熱伝導が無く、電子散乱が無い理想的な状態における理論的な熱起電力である。

1) 吉武道子、「機能材料」2013 年 2 月号 Vol. 33、pp. 48-55.

2) 吉武道子、第 60 回応用物理学会春季学術講演会（2013 年）：27pB6-1

3) 吉武道子、第 61 回応用物理学会春季学術講演会（2014 年）：19a-F4-1

